

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Coordenação dos Cursos de Pós-Graduação em
Física

Dissertação de Mestrado

Teorema do Índice em Superfícies Curvas
de Grafeno e Fases de Berry

Mirleide Dantas Lopes

João Pessoa
-2010-

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Coordenação dos Cursos de Pós-Graduação em
Física

Mirleide Dantas Lopes

Teorema do Índice em Superfícies Curvas
de Grafeno e Fases de Berry

Defesa apresentada à Universidade
Federal da Paraíba como requisito
parcial para a obtenção do título de
Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Claudio
Benedito Furtado

João Pessoa
-2010-

L864t Lopes, Mirleide Dantas.
Teorema do Índice em Superfícies Curvas de Grafeno e
Fases de Berry / Mirleide Dantas Lopes.- João Pessoa, 2010.
59f. : il.
Orientador: Cláudio Benedito Furtado
Dissertação (Mestrado) – UFPB/CCEN
1. Física. 2. Grafeno. 3. Teorema do Índice. 4. Fases de
Berry. 5. Computação quântica holonômica.

UFPB/BC

CDU: 53(043)



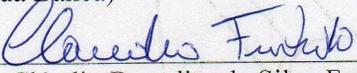
Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

DECLARAÇÃO

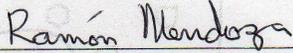
A Comissão Examinadora que abaixo assina este documento, reunida no dia 02 de dezembro de 2010, na Sala de Reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, **aprova** a Sra. **Mirleide Dantas Lopes** na defesa de sua dissertação intitulada “*Teorema do índice em superfícies curvas de grafeno e fases de Berry*”.

João Pessoa, 02 de dezembro de 2010

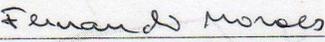
Orientador:
(Presidente da Banca)


Prof. Dr. Cláudio Benedito da Silva Furtado
(DF/UFPB)

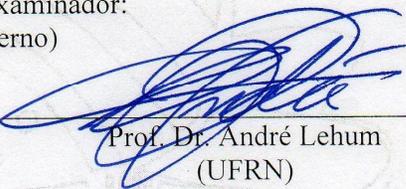
Co-Orientador:


Ramon Mendoza
(UFPE)

1º Examinador:
(Interno)


Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes
(DF/UFPB)

2º Examinador:
(Externo)


Prof. Dr. André Lehum
(UFRN)

Aos meus pais.

Epígrafe

Quem busca a verdade deve ousar ser sábio.

Karl R. Popper.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, por ter me dado condições para concluir este trabalho. Em seguida aos meus pais, que sempre foram a base de sustentação em todos os aspectos da minha formação.

Ao meu orientador, Cláudio Furtado, por ter me fornecido os subsídios necessários para que eu pudesse adentrar pelo mundo do grafeno.

Agradeço também às minhas irmãs, Sirleide Dantas e Nirleide Dantas, que sempre estiveram ao meu lado me ajudando a erguer a cabeça nos momentos difíceis e compartilhando comigo os momentos felizes.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para a elaboração deste trabalho.

E por fim, ao CNPQ pelo apoio financeiro concedido no decorrer destes estudos.

Resumo

O grafeno consiste em uma estrutura bidimensional hexagonal constituída apenas por átomos de carbono. Trata-se de uma molécula bastante peculiar, pois em baixas energias o seu hamiltoniano pode ser descrito pelo operador de Dirac e isso lhe confere características incomuns. Neste trabalho o teorema do índice será aplicado ao grafeno. Teorema que permite estimar o número de modos zero das variantes geométricas do grafeno por meio das características topológicas destas moléculas. Por fim, observa-se que o índice do hamiltoniano deste sistema pode ser descrito em termos das fases de Berry. E dessa forma, investiga-se a possibilidade de fazer computação quântica holonômica, a partir da topologia de tais moléculas.

Palavras chave: grafeno, teorema do índice, topologia e fases de *Berry*.

Abstract

The graphene consists of a two-dimensional hexagonal structure formed only by carbon atoms. It is a peculiar molecule, because in low energy its Hamiltonian can be described by the Dirac operator and this gives it some unusual characteristics. In this work the index theorem will be applied to graphene. This allows to estimate the number of zero modes of geometric variants of graphene by means of topological features of these molecules. Finally, it is observed that the index of the Hamiltonian of this system can be described in terms of Berry phases. And so, it is investigated the possibility of doing holonomic quantum computation using the topology of such molecules.

Keywords: graphene, index theorem, topology and Berry's phase.

Sumário

1	Introdução	3
2	O Grafeno	6
2.1	O grafeno pode existir?	9
2.2	O que são cristais bidimensionais?	10
2.3	Métodos de obtenção	11
2.4	Estrutura do grafeno	13
2.5	Características topológicas	14
2.6	Propriedades elementares	15
2.7	Modos zero no grafeno	19
2.8	Evidência experimental dos elétrons de Dirac	21
2.9	O efeito da curvatura	22
3	Teorema do índice	25
3.1	Introdução	25
3.2	Demonstração	26
3.3	O teorema de Euler	29
3.4	Aplicação do teorema do índice ao grafeno	33

4 Fases de Berry e o teorema do índice	36
4.1 Fases de Berry	36
4.1.1 As fases de Berry podem ser medidas?	38
4.1.2 Analogia com o fluxo magnético	39
4.1.3 Aplicação	40
4.2 Fases de Berry e o teorema do índice	41
4.3 Interpretação física	42
4.4 Cálculo de fases e outras características	43
5 Conclusão	47
A Fórmula de Berry	49
B Portas lógicas quânticas	52
Referências Bibliográficas	55

Capítulo 1

Introdução

O grafeno é um material que vem sendo amplamente investigado tanto do ponto de vista teórico, quanto a partir de observações experimentais. Consiste basicamente em uma rede bidimensional hexagonal, constituída apenas por átomos de carbono nos vértices dos hexágonos que formam a rede. Esta molécula possui características peculiares, que a torna uma forte candidata a substituta do silício. E ainda, muitas de suas variantes geométricas, a exemplo do nanotubo e do fulereno, podem ser entendidas melhor a partir do estudo do grafeno.

A descoberta experimental deste material é muito recente [1]. No entanto, ele já era conhecido teoricamente há bastante tempo [2]. O desinteresse em obtê-lo em laboratório se deve, em partes, as teorias que afirmavam a impossibilidade de sintetizar cristais bidimensionais isolados.

Com a demonstração experimental de que era possível obtê-lo, o grafeno despertou o interesse da comunidade científica. Hoje um grande número de cientistas está com a atenção voltada para este material.

Do ponto de vista teórico, diversos efeitos interessantes podem ser investigados

no grafeno, entre eles: o efeito *Hall* Quântico [3], quasipartículas [4], vórtices [5], fases de *Berry*[6], entre outros. Em baixas energias, esta molécula pode ser perfeitamente descrita pelo operador de *Dirac* relativístico. Isso permite explicar a maior parte dos múltiplos efeitos nela observados.

Neste trabalho o grafeno será investigado a partir do teorema do índice de *Atiyah-Singer*, teorema que permite estimar o número de modos zero existentes nas variantes geométricas do grafeno, a partir de suas características topológicas. Tais características podem ser entendidas como sendo fases de *Berry*, e com base nisso, investiga-se a possibilidade de fazer computação quântica holonômica no grafeno a partir da topologia da molécula em estudo.

De acordo com a estrutura deste trabalho, no segundo capítulo serão abordados os conceitos fundamentais referentes ao grafeno, tais como: características topológicas, discussão sobre alguns métodos de obtenção, modelo de hamiltoniano proposto, consequências do efeito de curvatura, enfim, características fundamentais para a compreensão desta molécula tão peculiar.

No terceiro capítulo será indicada a demonstração do teorema do índice. Em seguida, o teorema de *Euler* será trabalhado, a fim de relacionar o número de pentágonos e heptágonos inseridos na molécula com suas características topológicas. E por fim, o índice do grafeno será calculado em termos das peculiaridades topológicas de suas variantes geométricas.

No quarto capítulo primeiramente será feita uma breve abordagem sobre as fases de *Berry*, bem como a utilização destas na computação quântica holonômica. Posteriormente elas serão relacionadas com o índice do hamiltoniano obtido para o grafeno. E por último, será feita uma investigação que foge um pouco dos padrões da literatura, será investigada a possibilidade de obter tais fases por meio das

características topológicas da molécula.

No quinto e último capítulo serão feitas as conclusões, abordadas as futuras perspectivas de trabalho e também os possíveis empecilhos com os quais esse estudo pode se deparar.

Capítulo 2

O Grafeno

O carbono é um dos elementos químicos mais abundantes do Universo. Ele está presente em todas as formas de vida do planeta. Como este átomo possui seis elétrons, sua distribuição eletrônica é representada por $1s^2 2s^2 2p^2$. Isto implica dizer que ele é tetravalente, ou seja, pode ligar-se a quatro átomos distintos. Dependendo da natureza da ligação entre dois carbonos adjacentes, compostos com características totalmente diferentes podem ser gerados. Tamanha flexibilidade dá origem a uma grande quantidade de formas alotrópicas, que, por sua vez, possuem propriedades físicas bastante peculiares. Dentre as inúmeras formas alotrópicas do carbono, é possível destacar o grafeno, ver figura 2.1 (a), que além de possuir características peculiares, contribui para a compreensão das propriedades dos demais alótropos do carbono.

No estado sólido o carbono existe principalmente sob a forma de diamante e grafite. As características de tais compostos são totalmente distintas e, como já foi mencionado, isso se deve a maneira pela qual as ligações químicas são realizadas. No diamante os orbitais atômicos do carbono estão no estado de hibridização sp^3 ,

isto garante a referida configuração rigidez, dureza e uma maior estabilidade. No grafite a hibridização observada é do tipo sp^2 , neste caso os átomos estão arranjados de modo a constituir planos, folhas de grafeno, que são interligados por meio de forças de *Van der Waals*, ver figura 2.1 (b). A ligação entre os planos é fraca e isso favorece o deslizamento de um sobre o outro mediante a aplicação de uma força externa, o que possibilita a utilização do grafite como lubrificante.

Durante muito tempo acreditou-se que os únicos alótropos do carbono eram o diamante e o grafite. No entanto, em 1985 Kroto descobriu mais uma molécula constituída exclusivamente por estes átomos [7] e passou a chamá-la de fulereno. Esta molécula possui o formato de uma bola de futebol, ver figura 2.1 (c). A proposta inicial era de que ela fosse constituída por vinte células hexagonais e doze pentagonais, o que resultaria em sessenta átomos de carbono. Porém, hoje se sabe que existem fulerenos com mais de sessenta átomos.

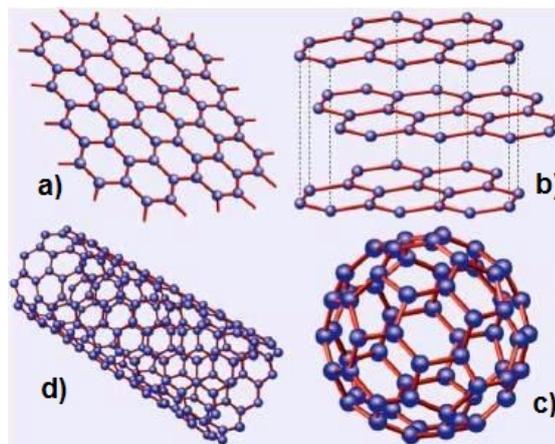


Figura 2.1: Alótropos do carbono. No sentido horário, a partir do canto superior esquerdo: grafeno, grafite, fulereno e nanotubo. Figura extraída de [8].

Os nanotubos de carbono, descobertos em 1991 por Iijima [9], também são alótropos do carbono. Eles são constituídos basicamente por uma folha de grafeno

enrolada, ver figura 2.1 (d), e dependendo da maneira que este procedimento for realizado, pode dar origem a três tipos de nanotubos diferentes.

Teoricamente o grafeno já era conhecido desde 1947. No entanto, ele só foi observado experimentalmente em 2004. A partir de então a comunidade científica passou a ter mais interesse por este sistema, pois além da sua importância para a compreensão dos demais alótropos, ele também se mostrou bastante propício a aplicações nas mais diversas áreas.

Desde que o grafeno foi isolado sua utilização vem sendo demonstrada e sugerida em inúmeros dispositivos, a exemplo de: células solares [10], sensores [11], transistores [12], dispositivos de memória [13], entre outros. A implementação destes dispositivos no grafeno torna-se possível devido à relativa facilidade de controlar os portadores de carga e a alta mobilidade que os mesmos possuem neste sistema.

Além de sua potencial aplicabilidade, o grafeno ainda é detentor de características físicas bastante interessantes do ponto de vista teórico. Em física da matéria condensada a equação de *Schrödinger* descreve de maneira satisfatória boa parte dos sistemas. O grafeno é uma exceção, pois ele é descrito melhor pela equação de *Dirac*, apesar de não haver nada de particularmente relativístico em elétrons se movendo em átomos de carbono. O modelo teórico proposto para o hamiltoniano do grafeno, que será abordado no decorrer deste trabalho, prevê a existência de elétrons de Dirac, elétrons que se comportam como se não possuíssem massa. Esta característica foi comprovada após a observação experimental do grafeno e trouxe grande euforia à comunidade científica. Tamanha peculiaridade permite que fenômenos similares aos estudados em mecânica quântica relativística sejam simulados no grafeno. Outro aspecto interessante do ponto de vista teórico também

observado neste sistema é que nele o *Efeito Hall Quântico* e, conseqüentemente, quasipartículas podem ser observados mesmo em temperatura ambiente. Fases de *Berry* também podem ser encontradas em tais sistemas, e a estas será dado um maior enfoque na continuidade desse estudo.

2.1 O grafeno pode existir?

Há mais de 70 anos, cientistas argumentaram que cristais estritamente bidimensionais eram termodinamicamente instáveis e não poderiam existir [14]. Esta teoria apontava que flutuações térmicas na estrutura de cristais de baixa dimensionalidade deveriam produzir deslocamentos de átomos comparáveis às distâncias interatômicas. Posteriormente essa argumentação foi refutada [15] com base em fortes argumentos experimentais.

De fato, a temperatura de fusão de filmes finos diminui rapidamente com a diminuição da espessura, o que os tornam instáveis. Por este motivo, até aquela época, cristais bidimensionais só eram conhecidos como parte integrante das estruturas maiores tridimensionais. Até que em 2004 a descoberta experimental do grafeno e de outros cristais bidimensionais, a exemplo do nitreto de Boro, fez com que os estudos teóricos sobre a estabilidade das estruturas em duas dimensões fossem repensados. Neste aspecto, algo importante a se destacar é que além de serem obtidos experimentalmente, os cristais bidimensionais encontrados apresentavam alta qualidade.

Alguns teóricos afirmam que os cristais bidimensionais obtidos experimentalmente estão em um estado metaestável, pois a estrutura tridimensional da qual eles foram extraídos são muito pequenas ($\ll 1mm$) e as ligações entre os átomos

que a constituem, muito fortes e isso garantiria que as flutuações não levassem a deslocação ou outros defeitos no cristal, mesmo em temperatura elevada [16]. Uma explicação complementar seria que com a compressão da terceira dimensão haveria um ganho de energia elástica que acabaria suprimindo as vibrações térmicas [17]. De qualquer forma, mesmo diante de algumas dificuldades teóricas de explicar a existência do grafeno, ele pode sim ser obtido experimentalmente.

2.2 O que são cristais bidimensionais?

Antes de analisar o grafeno propriamente dito é útil definir o que são cristais bidimensionais. Óbvio que um único plano atômico é um cristal $2D$, enquanto que 100 camadas deve ser considerada uma película fina de um material $3D$. No entanto, uma investigação interessante consiste em saber a partir de quantas camadas um determinado material deve ser considerado tridimensional. No caso do grafeno, esta situação já está praticamente esclarecida, pois foi demonstrado que a estrutura eletrônica se modifica muito rapidamente com o aumento do número de camadas e que, a partir de aproximadamente 10 delas o material já possui um caráter tridimensional, ou seja, torna-se grafite.

O grafeno só possui um espectro eletrônico de simples compreensão até o limite de duas camadas, pois a partir de um número superior a este começam a surgir efeitos mais complicados, a exemplo de sobreposição de bandas de valência e de condução. Por conta disso pode-se afirmar que o “grafeno” pode ser classificado em simples, duplo e múltiplas camadas. Sendo que as moléculas classificadas pelo último termo possuem entre 3 e 9, e estruturas com um número de camadas superior a este serão consideradas filmes finos de grafite. Do ponto de vista experimental

esta consideração é bastante plausível [18].

No decorrer deste trabalho apenas será investigado o grafeno com uma única camada.

2.3 Métodos de obtenção

A produção de grafeno em grande escala ainda se depara com muitos obstáculos a serem ultrapassados. Existem inúmeros procedimentos que vêm sendo experimentados na tentativa de tornar sua produção viável em uma escala industrial. Até então os procedimentos utilizados ainda não são tão eficazes, neste aspecto.

Como o grafite é basicamente composto por camadas de grafeno, um possível método de obtenção seria a clivagem desta primeira molécula através de processos químicos, onde substâncias seriam inseridas entre as camadas com intuito de separá-las. De modo que, o grafeno poderia ser estudado dentro da própria estrutura tridimensional do grafite, pois ele estaria de certa forma, isolado [19]. No entanto, os resultados obtidos com este procedimento não foram muito satisfatórios, devido ao caráter pouco controlável dos experimentos.

Também houve um pequeno número de tentativas de crescer o grafeno assim como é feito com o nanotubo. Este método consiste em tentar obter grafeno a partir da condensação de átomos de carbono, que por sua vez são obtidos, geralmente, por meio da evaporação de grafite de alta pureza. No entanto, através dessa técnica o que vem sendo obtido são filmes finos de grafite, da ordem de 100 camadas [20].

Por outro lado, muitas amostras de grafeno com poucas camadas (uma ou duas) vêm sendo obtidas pelo método de crescimento epitaxial. A idéia geral deste processo é decompor gases ou vapores contendo átomos de carbono, em geral hidro-

carbonetos, e posteriormente fazer uso de substratos, geralmente metais, para que os átomos de carbono se depositem e, deste modo, constituam o grafeno [21]. Este método é o que aparenta ser o mais promissor em termos de produção em larga escala. Algumas variações dele estão sendo desenvolvidas. Nos Estados Unidos um grupo de pesquisadores elaborou uma técnica que consiste em aquecer grafite e rutênio a cerca de $1.150C$, a essa temperatura os átomos de carbono são absorvidos pelo rutênio. Em seguida, eles passam por um processo de resfriamento, em torno de $850C$, temperatura na qual os átomos de carbono começam a se organizar formando pequenas ilhas sob a superfície do rutênio, que irão se conectar e posteriormente formar a primeira camada de grafeno. Prosseguindo com o resfriamento uma segunda camada de grafeno é formada sob o substrato. A primeira camada possui uma forte adesão com a superfície de rutênio e, portanto, sua remoção é um tanto complicada. No entanto, a segunda camada possui uma adesão bem menor e isto facilita a sua remoção e assim a obtenção de uma única folha de grafeno [22]. Para uma melhor compreensão deste método, na figura 2.2 é ilustrada uma representação esquemática do mesmo.

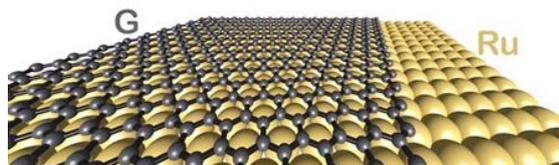


Figura 2.2: Representação esquemática de uma primeira camada de grafeno crescida sob um substrato de rutênio. Figura extraída de [22].

2.4 Estrutura do grafeno

Como já mencionado, o grafeno é uma rede bidimensional hexagonal composta apenas por átomos de carbono. Trata-se de um raro exemplo na ciência onde teoria e aplicações tecnológicas desenvolvem-se simultaneamente. A simples configuração geométrica dos átomos de carbono no grafeno faz com que interessantes efeitos em escala macroscópica sejam observados. A aplicabilidade de tais efeitos na área tecnológica faz do grafeno um forte candidato a substituto do silício.

No grafeno, os átomos de carbono apresentam hibridização do tipo sp^2 , ou seja, ocorre uma mistura, de dois orbitais p com um orbital s , que resulta em três orbitais híbridos sp^2 , restando apenas um orbital p puro [23]. Os orbitais híbridos serão os responsáveis pelas ligações σ e estas, por sua vez, são as responsáveis pela rigidez da rede. O elétron que se encontra no orbital p irá ligar-se a outros por meio de ligações π . As ligações σ estão no plano do grafeno, já as ligações π são perpendiculares a ele. Esta representação é ilustrada na figura 2.3.

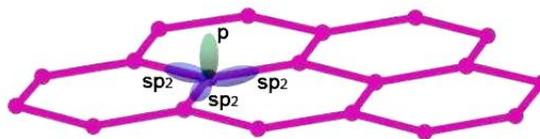


Figura 2.3: Representação dos orbitais atômicos do carbono. Figura extraída de [24].

Dessa forma, pode-se afirmar que, as ligações σ são as responsáveis pelas propriedades mecânicas da rede hexagonal, enquanto que as ligações π são responsáveis pelas propriedades eletrônicas, pois cada ligação π possui um orbital p semi-preenchido. Os elétrons neste orbital tunelam de um sítio pra outro da rede respeitando, obviamente, o princípio de exclusão de Pauli. Tal propriedade

torna possível a construção de um modelo bastante simples para o hamiltoniano do grafeno, que será estudado no decorrer deste trabalho.

2.5 Características topológicas

O grafeno dá origem a diversos objetos geométricos. O estudo das características topológicas desses objetos é importante para a compreensão dos sistemas constituídos apenas por átomos de carbono. As características topológicas estão mais voltadas para as propriedades globais destes objetos sem ter a preocupação com detalhes locais. Por exemplo, um toro e uma esfera são superfícies compactas, enquanto que um plano ou um cilindro são superfícies abertas. Para fazer uma melhor distinção entre superfícies compactas será definida uma quantidade denominada gênero, simbolizada pela letra g . Este gênero está associado a quantidade de “buracos” que a superfície possui, por exemplo, a esfera tem $g = 0$ e o toro tem $g = 1$. A partir do grafeno inúmeras configurações são possíveis e muitas delas são comumente encontradas na natureza como, os nanotubos e os fulerenos. Estas moléculas podem surgir quando é adicionado ao grafeno, teoricamente composto apenas por células hexagonais, pentágonos ou heptágonos, pois a inserção destas células induzem a curvatura da folha de carbono [25]. O número de faces abertas, definido por N , de uma determinada estrutura também é utilizado para caracterizá-la topologicamente, por exemplo, um nanotubo possui $N = 2$, enquanto uma esfera possui $N = 0$. O estudo da topologia de tais estruturas é importante, pois permite analisar a relação existente entre aspectos relativamente macroscópicos e a mecânica quântica, como será demonstrada posteriormente.

2.6 Propriedades elementares

A rede hexagonal do grafeno não é uma rede de Bravais [26]. No entanto, ela pode ser entendida como sendo a sobreposição de duas redes triangulares, como ilustra a figura 2.4.

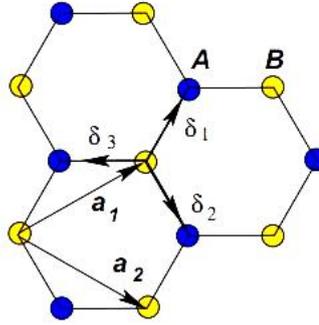


Figura 2.4: Sub-redes A e B , vetores da rede \vec{a}_1 e \vec{a}_2 e os vizinhos mais próximos. Figura extraída de [8].

Os vetores a_1 e a_2 , que são os vetores de rede, são dados por, $\vec{a}_1 = a(3/2, \sqrt{3}/2)$ e $\vec{a}_2 = a(3/2, -\sqrt{3}/2)$, onde, a é a distância entre dois átomos de carbono adjacentes e que, de acordo com dados experimentais [27], é 1.42 angstrom . Cada sítio B está ligado a três sítios A pelos vetores,

$$\vec{\delta}_1 = a(1/2, \sqrt{3}/2), \quad \vec{\delta}_2 = a(1/2, -\sqrt{3}/2) \quad e \quad \vec{\delta}_3 = a(-1, 0). \quad (2.1)$$

Os sítios A e B são gerados por,

$$A(n_1, n_2) = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + \vec{\delta}_3, \quad (2.2)$$

$$B(n_1, n_2) = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2, \quad (2.3)$$

onde n_i são inteiros. Os vetores da rede recíproca, que também é hexagonal, são facilmente obtidos resolvendo a equação, $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$. Eles são dados por, $\vec{b}_1 = 2\pi/3a (1, \sqrt{3})$ e $\vec{b}_2 = 2\pi/3a (1, -\sqrt{3})$.

Algumas propriedades eletrônicas do grafeno podem ser descritas eficientemente através do modelo *tight binding*. Neste modelo elétrons tunelam de um sítio para outro da rede hexagonal respeitando, obviamente, o princípio da exclusão de Pauli. O hamiltoniano que descreve este comportamento é dado por [28],

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j, \quad (2.4)$$

onde J fornece a intensidade da transição, que se dá mediante o tunelamento. Os índices i e j são utilizados para sinalizar as regiões onde estas transições estão ocorrendo, os sítios da rede. Os operadores a_i^\dagger e a_j são, respectivamente, operadores de criação e aniquilação, ou seja, quando o operador a_i^\dagger cria um elétron em um determinado sítio da rede definido pelo índice i , o operador a_j aniquila um elétron em j .

Observando a periodicidade das redes triangulares A e B e considerando apenas os três vizinhos mais próximos, dispostos na equação (2.1), é possível fazer uma transformada de Fourier onde, $a(\vec{k}) = \sum_j e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_j} a_j$ e , dessa forma, obter,

$$H = -J \iint d^2k \left(a_A^\dagger(\vec{k}), a_B^\dagger(\vec{k}) \right) \begin{pmatrix} 0 & \sum_{i=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_i} \\ \sum_{i=1}^3 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_i} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_A(\vec{k}) \\ a_B(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

onde $a_A(\vec{k})$ e $a_B(\vec{k})$ são os operadores que caracterizam cada uma das redes, A

e B, após a transformada de Fourier. O próximo passo consiste em encontrar os autovalores de energia do hamiltoniano e isso pode ser feito diagonalizando a matriz que está no interior da integral na equação (2.5), fazendo este procedimento obtém-se,

$$E(\mathbf{k}) = \pm J \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right) + 4 \cos \left(\frac{3k_x}{2} \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}k_y}{2} \right)}, \quad (2.6)$$

tais estados possuem propriedades bastante peculiares. Eles tornam-se zero em pontos determinados do momento. Estes pontos são chamados de pontos de Fermi e são localizados por $\mathbf{K}_+ = 2\pi/3 (1, 1/\sqrt{3})$ e $\mathbf{K}_- = 2\pi/3 (1, -1/\sqrt{3})$. A obtenção de tais pontos é bastante simples, basta resolver a equação $E(\mathbf{k}) = 0$. O gráfico da equação (2.6) é ilustrado na figura 2.5.

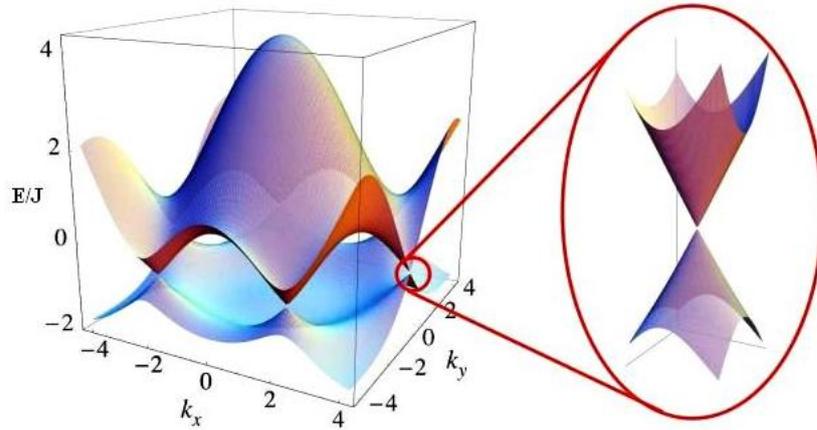


Figura 2.5: Esquerda: espectro de energia. Direita: comportamento perto dos pontos de Fermi. Figura extraída de [8].

Em baixas energias, o grafeno pode ser descrito pelo comportamento do hamiltoniano, disposto na equação (2.5), perto dos pontos de Fermi. O espectro de energia deste hamiltoniano é ilustrado na figura 2.5. Neste gráfico é possível ob-

servar que, próximo aos pontos de Fermi o comportamento da relação de dispersão é linear.

A conclusão feita anteriormente também pode ser obtida, fazendo na equação (2.5), $\mathbf{k} = \mathbf{K}_\pm + \mathbf{p}$ e, em seguida, expandindo o hamiltoniano em potências de $|\mathbf{p}|$ e considerando apenas os termos de primeira ordem, ou seja, $|\mathbf{p}|$ pequeno. Realizando tal procedimento obtém-se,

$$\begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix} \Psi(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.7)$$

o termo H_\pm é a expansão do hamiltoniano, disposto em (2.5), em torno de cada um dos pontos de Fermi, $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ e $\boldsymbol{\gamma}$ são as matrizes de Dirac,

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & -\sigma^* \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

onde $\sigma = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ são as matrizes de Pauli. Por simplicidade foi escolhido $3J/2 = 1$.

A equação (2.7) mostra que devido à existência dos pontos de Fermi, em baixas energias, o grafeno pode ser descrito pelo operador de Dirac relativístico \mathcal{D} , que é dado por $\mathcal{D} = \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}$.

Os autoestados do operador de Dirac são os vetores bidimensionais, chamados espinores, que são dados por $(|\mathbf{K}_\pm A\rangle, |\mathbf{K}_\pm B\rangle)^T$, onde suas componentes são as funções de onda correspondentes a cada elemento A ou B , para cada ponto de Fermi \mathbf{K}_\pm .

Duas conclusões são facilmente extraídas destes resultados. O operador de

Dirac relativístico justifica a alta mobilidade dos elétrons no grafeno. E a presença dos pontos de Fermi torna possível a compreensão do comportamento semi-metálico desta molécula.

2.7 Modos zero no grafeno

Os elétrons nos cristais, a exemplo do grafeno, estão dispostos em bandas de energia, como ilustra a figura 2.5. Estas bandas são resultantes da interação entre as autofunções associadas aos elétrons e os íons da rede cristalina. Tais interações são essenciais para a compreensão da condutividade elétrica destes materiais, pois mediante a aplicação de um campo elétrico, estes elétrons irão se comportar conforme estiverem dispostos nas respectivas bandas.

Uma maneira ilustrativa de descrever o surgimento das bandas é considerando que, quando os átomos se unem para formar um cristal, suas funções de onda se superpõem, o que resulta em um desdobramento dos níveis de energia, transformando-os em bandas de energia.

Neste trabalho será ilustrado um sistema de níveis de energia apenas para justificar a importância dos modos zero, autovalores de energia nulos, pois, de fato, o grafeno consiste em um sistema de bandas de energia, no entanto, como ele tem sua origem em um sistema de níveis, este será considerado apenas para que seja obtida uma compreensão melhor do problema.

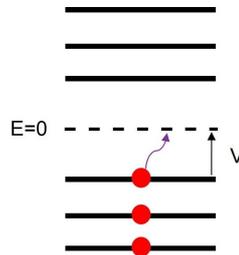


Figura 2.6: Representação dos níveis de energia de um sistema fermiônico.

Em tais sistemas é comum estudar o hamiltoniano como sendo simétrico em torno de $E = 0$, ver figura 2.6, onde a parte do espectro anterior à $E = 0$, a parte negativa, é denominada banda de valência e a parte posterior à $E = 0$, a parte positiva, é denominada banda de condução. De acordo com o princípio de Exclusão de Pauli, os elétrons vão ocupando os níveis de energia mais baixos, energias negativas, até atingir a energia nula, que corresponderá à metade do preenchimento da banda. Quando é aplicada a este sistema uma pequena diferença de potencial V , se houverem modos zero, eles poderão ser ocupados e o sistema irá se comportar como um condutor.

Na ausência de modos zero uma pequena diferença de potencial não será suficiente para fazer com que níveis de energia mais altos sejam ocupados e, dessa forma, o sistema irá se comportar como um isolante. Como mencionado, a representação simplória ilustrada na figura 2.6 pode ser, de maneira análoga, estendida à compreensão de um sistema de bandas ilustrado na figura 2.5. De modo a tornar possível a compreensão da condutividade térmica, a partir da existência de modos zero no sistema, mesmo em se tratando de um sistema de bandas de energia, como é o caso.

2.8 Evidência experimental dos elétrons de Dirac

Partículas ultra-relativísticas, ou seja, que possuem velocidades próximas à da luz ($pc \gg mc^2$), são descritas pela equação de Dirac. Fazendo uma aproximação semi-clássica [8], acarreta que a massa *cyclotron* destas partículas irá depender da raiz quadrada da densidade eletrônica, de forma que,

$$m^* = \frac{\sqrt{\pi}}{v_F} \sqrt{n}, \quad (2.9)$$

onde v_F é a velocidade de *Fermi* e n é densidade de elétrons.

Observações experimentais mostraram que há no grafeno uma dependência entre a massa *cyclotron* e a raiz quadrada da densidade eletrônica [29]. E este resultado favorece o entendimento de que realmente existem elétrons de Dirac no grafeno. Na figura 2.7 esta relação é evidenciada a partir de dados provenientes dos experimentos anteriormente citados.

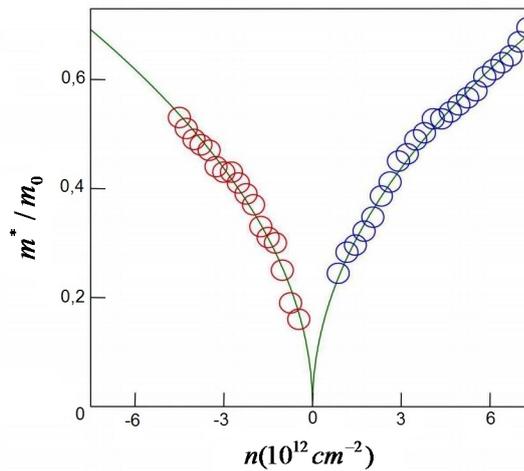


Figura 2.7: Massa cyclotron da carga carregada no grafeno em função da concentração n . Concentrações positivas e negativas referem-se a elétrons e buracos, respectivamente, e m_0 é massa do elétron livre. Figura extraída de [8].

2.9 O efeito da curvatura

O grafeno pode dar origem a superfícies com curvatura positiva, negativa ou nula. Isto torna plausível o surgimento do operador relativístico de Dirac em baixas energias. A inserção de um pentágono induz no grafeno curvatura negativa, a inserção de heptágonos, curvatura positiva, de modo que, ao inserir uma mesma quantidade de pentágonos e heptágonos neste sistema, ele não será curvo. Mas o efeito da curvatura não se resume apenas ao surgimento do operador de Dirac, ele também dá origem a um campo de calibre efetivo que precisa ser adicionado ao hamiltoniano. Este campo gera um fluxo magnético que atravessa a superfície da molécula.

É possível compreender como se dá o surgimento da curvatura no grafeno a partir de um procedimento hipotético. Corta-se um setor $\pi/3$ do grafeno e, em seguida suas extremidades são coladas, como ilustra a figura 2.8.

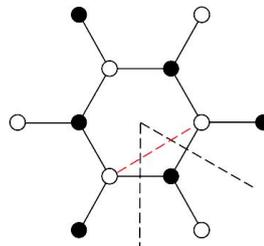


Figura 2.8: Modelo hipotético para a inserção de curvatura no grafeno. Após o procedimento mencionado, dois sítios brancos, as bolinhas, estarão conectados. Figura extraída de [28].

Este processo origina um cone com um pentágono no vértice e todas as outras células da rede permanecem hexagonais. A curvatura inserida na molécula pode ser calculada pela circulação de um vetor tangencial T ao redor do vértice do cone

gerado, ou seja,

$$\oint \mathbf{T} \cdot d\mathbf{r} = \frac{\pi}{3} \quad (2.10)$$

Mas isto não é tudo, pois este procedimento faz com que dois sítios da mesma rede sejam conectados, como ilustrado na figura 2.8. Observando o grafeno plano, ver figura 2.4, é possível perceber o oposto, nele cada sítio da rede A está conectado a um sítio da rede B , e vice-versa. De fato, quando um spinor Ψ é transportado em torno do vértice do cone gerado, por um ângulo 2π , ele é forçado a ir de um sítio para outro da mesma rede. Isto lembra o efeito que um campo magnético gera sobre a função de onda de um elétron que percorre um caminho fechado. A circulação completa faz com que a função de onda do elétron adquira um fator de fase que é proporcional ao fluxo magnético. Este efeito é conhecido como efeito *Aharonov-Bohm* [30]. Em termos de mecânica quântica, o campo magnético introduz uma descontinuidade na função de onda do elétron. Baseado neste efeito é possível considerar que a descontinuidade gerada no grafeno, devido ao efeito de curvatura, pode dar origem a um campo de calibre efetivo.

Dessa forma, o hamiltoniano resultante deve incluir tanto o efeito de curvatura, quanto à contribuição dada pelo campo de calibre efetivo. Esta segunda contribuição será introduzida adicionando ao hamiltoniano do grafeno um potencial vetor não-abeliano, \mathbf{A} , cuja circulação em torno de um caminho fechado C , é dada por,

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{\pi}{2} \tau^y, \quad (2.11)$$

onde τ^y é a segunda matriz de Pauli, ela irá misturar as componentes do espinor.

Sendo assim, a equação (2.7) será modificada para [24],

$$H = \begin{pmatrix} -ie_k^\mu \sigma^k (\nabla_\mu - ieA_\mu) & 0 \\ 0 & ie_k^\mu \sigma^k (\nabla_\mu + ieA_\mu) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

onde $\nabla = \partial - i\Omega$ e Ω descreverá o efeito de curvatura sobre os espinores, cuja circulação será,

$$\oint_C \Omega \cdot d\mathbf{r} = -\frac{\pi}{6} \sigma^z, \quad (2.13)$$

o termo e_k^μ torna o hamiltoniano covariante, visto que agora o espaço é curvo.

Para o caso de um calibre abeliano, onde o campo magnético correspondente é dado por $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, a circulação de \mathbf{A} em torno deste caminho fechado C será,

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{\pi}{2}. \quad (2.14)$$

A equação final de Dirac, $H\Psi = E\Psi$, onde H é dado por (2.12), é uma boa aproximação para as variantes geométricas do grafeno [31], pois torna mais compreensível algumas propriedades desta molécula, como será demonstrado oportunamente.

Capítulo 3

Teorema do índice

3.1 Introdução

Na literatura existem vários teoremas do índice. Neste trabalho será abordado o teorema do índice de *Atiyah-Singer*.

É plausível considerar os níveis de energia de um sistema fermiônico simétricos em torno de $E = 0$, ver figura 2.6, e como já foi mencionado no capítulo anterior, a presença de modos zero em tais sistemas é fundamental para o surgimento de determinadas propriedades eletrônicas. Nestes termos, pode-se afirmar que o teorema do índice é muito importante para o estudo do grafeno, pois ele fornece uma boa estimativa para o número de modos zero de um dado sistema sem a necessidade de diagonalizar o hamiltoniano.

O teorema do índice, de modo geral, torna possível a compreensão da estrutura do espectro de certos operadores, como o operador de Dirac, sem precisar diagonalizá-lo. Estas informações podem ser obtidas a partir das propriedades gerais dos operadores e da geometria do espaço. O procedimento consiste em

obter uma relação entre o número de autoestados com energia zero do operador de Dirac, que corresponderá ao hamiltoniano do sistema, e o fluxo total que atravessa a superfície em estudo. Posteriormente, tal fluxo é relacionado com o gênero e o número de faces abertas da superfície trabalhada, através da equação característica de Euler, onde finalmente, é obtida a relação entre os modos zero e a topologia da superfície.

O índice de um dado operador, quantidade obtida por meio do referido teorema que será definida, em termos matemáticos, mais adiante, é também interessante por tratar-se de um invariante topológico, ou seja, dada uma transformação homeomórfica ¹ o índice do sistema permanecerá inalterado [32].

3.2 Demonstração

O hamiltoniano proposto para o grafeno, em baixas energias, pode ser representado pelo operador de Dirac relativístico. Dessa forma, o ponto de partida para a demonstração do teorema será esse operador, que é representado por,

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 0 & P^\dagger \\ P & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

onde P é o operador que leva os autovetores de um subespaço V^+ em um subespaço V^- e P^\dagger leva os autovetores de um subespaço V^- em V^+ .

As soluções de interesse são as soluções da equação $\mathcal{D} \Psi = 0$. O número de autoestados do operador P com energia nula será definido por ν_+ e no caso do operador P^\dagger , essa mesma quantidade será definida por ν_- . Para auxiliar a

¹Homeomórfica é toda transformação contínua cuja inversa também é contínua [32].

resolução deste problema, também será introduzido o operador quiralidade, que é definido por,

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

e por simplicidade, no decorrer desta demonstração ao invés de utilizar operador \mathcal{D} , será utilizado o operador \mathcal{D}^2 . Ambos dispõem da mesma quantidade de autoestados, no entanto, o segundo possui a vantagem de ser diagonal, dessa forma, obtém-se,

$$\mathcal{D}^2 = \begin{pmatrix} P^\dagger P & 0 \\ 0 & P P^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

É possível demonstrar que os operadores $P^\dagger P$ e $P P^\dagger$ possuem os mesmos autovalores diferentes de zero. De fato, sendo u um autoestado qualquer, tal que,

$$P P^\dagger u = \lambda u, \quad (3.4)$$

aplicando o operador P^\dagger na equação (3.4),

$$P^\dagger P(P^\dagger u) = \lambda P^\dagger u, \quad (3.5)$$

ou seja, $P^\dagger P$ e $P P^\dagger$ possuem os mesmos autovalores. No entanto, para $\lambda = 0$ isso não é verdade, pois neste caso, $P^\dagger u$ também pode ser zero. Dessa forma, chega-se a conclusão que o número de autovalores nulos (autovalores importantes para esta teoria) dos operadores $P^\dagger P$ e $P P^\dagger$ podem não ser os mesmos.

Dando continuidade a demonstração do teorema, será utilizado $Tr(\hat{f}e^{-t\hat{D}})$, cuja

expansão conhecida como *expansão do heat kernel* [33] e é dada por,

$$\text{Tr}(\hat{f}e^{-t\hat{D}}) = \frac{1}{4\pi t} \sum_{k \geq 0} t^{k/2} a_k(\hat{f}, \hat{D}), \quad (3.6)$$

onde Tr representa o traço da matriz e a_k os coeficientes da expansão.

Por outro lado,

$$\text{Tr}(\gamma_5 e^{-t\mathcal{D}^2}) = \text{Tr}(e^{-tP^\dagger P}) - \text{Tr}(e^{-tPP^\dagger}) = \sum_{\lambda_+} e^{-t\lambda_+} - \sum_{\lambda_-} e^{-t\lambda_-}, \quad (3.7)$$

onde λ_+ são os autovalores do operador $P^\dagger P$ e λ_- os autovalores do operador PP^\dagger . Foi demonstrado anteriormente que os autovalores diferentes de zero destes operadores são iguais, ou seja, quando eles forem substituídos na equação (3.7), irão se anular mutuamente. No entanto, isto não é necessariamente verdade para os valores de λ_+ e λ_- iguais a zero. Sendo assim, a equação (3.7), pode ser escrita da seguinte maneira,

$$\text{Tr}(\gamma_5 e^{-tD^2}) = \nu_+ - \nu_-, \quad (3.8)$$

onde ν_+ e ν_- são, respectivamente, o número de autovalores nulo do operador $P^\dagger P$ e PP^\dagger , ou seja, $\nu_+ = \dim N(P^\dagger P)$ e $\nu_- = \dim N(PP^\dagger)$.

Fazendo $\hat{f} = \gamma_5$ e $D = \mathcal{D}^2$ na equação (3.6) e a comparando com a equação (3.8) é possível observar que apesar de ambas representarem o traço do mesmo operador, a primeira depende do parâmetro t , mas a segunda não. Dessa forma conclui-se que, para este sistema todos os coeficientes da expansão (3.6) se cancelarão, restando apenas o termo a_2 , pois para $k = 2$ não há dependência em t , ou seja,

$$\text{Tr}(\gamma_5 e^{-tD^2}) = \frac{a_2}{4\pi}. \quad (3.9)$$

O coeficiente a_2 , já é conhecido [28], ele pode ser obtido a partir do termo de primeira ordem da expansão em t da exponencial na equação (3.9). Para este cálculo é plausível considerar $\mathcal{D}^2 = -g^{\mu\nu}\nabla_\mu\nabla_\nu + \frac{i}{4}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]F_{\mu\nu} - \frac{1}{4}R$, onde $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ e R é o escalar de curvatura. O campo magnético em termos de $F_{\mu\nu}$ é dado por $B_k = \frac{1}{2}\epsilon^{k\mu\nu}F_{\mu\nu}$. Fazendo as considerações anteriores e substituindo-as na equação (3.9), obtém-se,

$$a_2 = Tr \left\{ \gamma_5 \left(\frac{i}{4} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] F_{\mu\nu} - \frac{1}{4} R \right) \right\} = 2 \iint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}, \quad (3.10)$$

combinando os resultados obtidos para o $Tr(\gamma_5 e^{-tD^2})$ e sabendo que o índice do operador \mathcal{D} é dado por, $ind(\mathcal{D}) = \nu_+ - \nu_-$, conclui-se que,

$$ind(\mathcal{D}) = \nu_+ - \nu_- = \frac{1}{2\pi} \iint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}. \quad (3.11)$$

Esta é a equação para o teorema do índice, equação que relaciona o número de autoestados com energia zero e o fluxo efetivo sobre a superfície em estudo. Posteriormente será demonstrado que este fluxo será facilmente calculado para o grafeno e suas variantes geométricas através do teorema de Euler.

3.3 O teorema de Euler

Euler foi o primeiro a chamar atenção para o número $\chi = V - A + F$ [34], conhecido como característica de Euler, onde V é o número de vértices, A o número de arestas e F o número de faces de um dado poliedro. A característica de Euler

também pode ser escrita da seguinte maneira,

$$\chi = V - A + F = 2(1 - g), \quad (3.12)$$

onde a segunda equação é denominada teorema de Euler e g é o gênero do objeto em estudo.

Importantes informações a respeito da curvatura do sistema podem ser obtidas a partir do teorema de Euler. Por exemplo, superfícies compactas com $\chi < 0$ possuem curvatura negativa, de igual modo, superfícies compactas com $\chi > 0$ possuem curvatura positiva, como é o caso da esfera, que possui $g = 0$ e, consequentemente, $\chi = 2$ (ou seja, possui curvatura positiva), bem como todos os seus homeomorfos, visto que, χ é um invariante topológico [35].

Este teorema pode facilitar a compreensão do grafeno e suas variantes geométricas, pois é possível obter uma relação entre o número de células de uma dada molécula de grafeno e o seu respectivo gênero g , relação esta que será muito útil para o cálculo do fluxo efetivo que atravessa a molécula.

Será considerado que as variantes geométricas do grafeno serão compostas apenas por hexágonos, heptágonos e pentágonos, onde n_5 , n_6 e n_7 corresponderão, respectivamente, a cada uma dessas células existentes na molécula.

Em poliedros oriundos do grafeno é possível afirmar que o número total de faces é dado por, $F = n_5 + n_6 + n_7$. Já para os vértices $V = (5n_5 + 6n_6 + 7n_7)/3$, pois cada uma das células tem a quantidade de vértices igual a quantidade de lados, por exemplo, um pentágono possui cinco lados e, consequentemente, cinco vértices, no entanto, cada um deles é compartilhado por três células diferentes, por isso a divisão por três. De maneira similar, o número total de arestas é dado

por $A = (5n_5 + 6n_6 + 7n_7)/2$. Substituindo essas quantidades na equação (3.12), obtém-se,

$$\chi = 2(1 - g) = \frac{n_5 - n_7}{6}, \quad (3.13)$$

ou seja, no caso do grafeno, é possível reescrever a característica de Euler em termos do número de pentágonos e heptágonos que estão presentes na molécula.

A análise desta simples equação traz consigo inúmeras informações. Se por exemplo, o número de pentágonos de uma dada molécula for igual ao número de heptágonos eles se cancelarão e não introduzirão nenhuma mudança na curvatura da molécula, de forma que, se ela for plana, continuará sendo. Outra conclusão que pode ser facilmente obtida é que, configurações que possuam gênero zero só serão possíveis se possuírem pentágonos em excesso, da mesma forma que, configurações com gênero superior a um só serão possíveis se houver excesso de heptágonos. Um exemplo que ilustra com eficácia a aplicabilidade da equação (3.13) é o C_{60} , um tipo de fulereno. Esta molécula, como já mencionado, é constituída por doze pentágonos e vinte hexágonos. Sabendo que o poliedro resultante dela é homeomorfo à esfera, ou seja, possui $g = 0$ e, conseqüentemente, $\chi = 2$, é possível afirmar que a equação (3.13) é realmente consistente com a realidade, pois além de evidenciar a positividade da curvatura, devido ao fato de $\chi > 0$, ainda corrobora com os dados experimentais que sinalizam que o número de heptágonos nestas estruturas é zero.

No caso do toro, nenhum pentágono ou heptágono são necessários, pois como ilustra a figura 3.1, $g = 1$ e, portanto, $\chi = 0$.

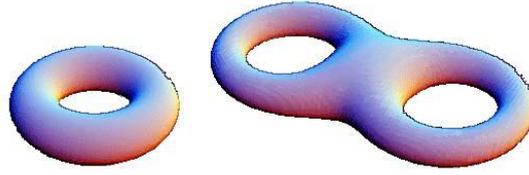


Figura 3.1: Esquerda: toro. Direita: bitoro.

Para o bitoro, ver figura 3.1, ($g = 2$ e $\chi = -2$), $\chi < 0$, dessa forma, deve haver um excesso de heptágonos e uma possível configuração é dada por $n_5 = 0$ e $n_7 = 12$.

A equação (3.13) é útil apenas para superfícies compactas, que foram as apresentadas até o momento. No entanto, a molécula de grafeno também pode dar origem a superfícies abertas, como os nanotubos. O toro, é um exemplo de superfície compacta que pode transformar-se em uma superfície aberta. Através de um procedimento hipotético, qual seja, fazer um corte de modo a transformá-lo em um cilindro, este objeto, anteriormente compacto, adquire duas faces abertas. Sendo assim, para que a característica de Euler seja aplicada neste estudo, devem ser inseridas algumas condições de contorno [36]. Uma generalização possível para este teorema é dada por,

$$\chi = \frac{n_5 - n_7}{6} = 2(1 - g) - N, \quad (3.14)$$

onde N é o número de faces abertas. A equação (3.14) diz que, a cada gênero excluído do sistema, duas faces abertas serão incluídas. Ela se aplica bem ao nanotubo, que possui $g = 0$ e $N = 2$ e isto implica que, $n_5 = n_7$, um resultado já conhecido, pois o nanotubo pode ser visto como uma folha de grafeno enrolada e esta, teoricamente, é constituída apenas por células hexagonais, ou seja,

$$n_5 = n_7 = 0.$$

Em geral, diversas configurações de gênero g e número de faces N podem ser consideradas. A relação obtida na equação (3.14) será muito útil, pois a partir dela será possível obter o fluxo efetivo que atravessa a molécula.

3.4 Aplicação do teorema do índice ao grafeno

De acordo com a equação (3.11) para que o teorema do índice seja aplicado ao grafeno é necessário calcular o fluxo efetivo que atravessa a molécula. Por outro lado, sabe-se que distorções pentagonais, assim como distorções heptagonais, introduzem na rede hexagonal uma contribuição dada pela circulação do potencial vetor, $\oint_{C_p} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \pi/2$. Utilizando o teorema de *Stokes* é possível relacionar a circulação do potencial de calibre ao redor de uma dada célula, heptagonal ou pentagonal, com o fluxo correspondente, dessa forma,

$$\oint_{C_p} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \iint_{S_p} \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}, \quad (3.15)$$

onde S_p é a área da célula correspondente.

A partir da equação (3.15) é possível obter o fluxo total que atravessa a superfície da molécula, pois como pentágonos e heptágonos contribuem com o fluxo de maneira oposta [31], obtém-se

$$\frac{1}{2\pi} \iint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \frac{1}{2\pi} \sum_{n_5-n_7} \oint_{C_p} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{1}{2\pi} \frac{\pi}{2} (n_5 - n_7). \quad (3.16)$$

Dessa forma, o problema se resume a encontrar a diferença entre o número de pentágonos e heptágonos existentes na molécula. No entanto, esta quantidade

já foi previamente obtida na equação (3.14), através da característica de Euler e, portanto,

$$\frac{1}{2\pi} \iint_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 3(1 - g) - \frac{3}{2}N. \quad (3.17)$$

O número total de modos zero é a soma das contribuições de cada sub-operador H_{\pm} do hamiltoniano disposto na equação (2.12). Considerando os resultados obtidos anteriormente, em especial os das equações (3.11) e (3.17), é possível afirmar que o índice do hamiltoniano que descreverá as moléculas oriundas do grafeno será dado por,

$$ind(H) = \nu_+ - \nu_- = 6(1 - g) - 3N \quad (3.18)$$

Este é o resultado final que relaciona o número de modos zero presentes em uma dada molécula de grafeno e as características topológicas de sua superfície. Na verdade, a equação (3.18) fornece o número mínimo de modos zero possíveis. Para que a quantidade exata seja definida é preciso que $\nu_+ = 0$ ou $\nu_- = 0$. Isto ocorre para a maioria dos casos onde o índice é diferente de zero [24]. No caso do nanotubo, em que o índice é nulo, existem duas possibilidades, $\nu_+ = \nu_- = 0$, ou seja, a molécula seria isolante por não possuir modos zero, como é o caso do nanotubo zigue-zague, ou ela possuiria $\nu_+ = \nu_-$, porém diferentes de zero, ou seja, a molécula seria condutora, como ocorre com o nanotubo *arm-chair*.

O teorema do índice aplicado no grafeno reproduz de maneira eficaz alguns resultados já conhecidos. O fulereno, $g = 0$ e $N = 0$, é um bom exemplo disto. Mediante tal configuração topológica, espera-se que ele tenha no mínimo seis modos zero e isto é bastante condizente com a realidade, pois o fulereno tem dois modos tripleto com energias muito próximas de zero. Obviamente, em se tratando de moléculas reais, alguns pequenos desvios são possíveis. Durante todas as demons-

trações sempre foram consideradas baixas energias, ou seja, grandes comprimentos de onda. Nesta aproximação as deformações inseridas na rede não afetam, de forma significativa, a energia dos modos zero. Assim, o resultado obtido em (3.18) se aplica melhor a moléculas maiores. Isto é visivelmente observado nas moléculas de fulereno (C_{60} , C_{180} , C_{540} e C_{1620}), onde, quanto maior a molécula mais a energia dos modos zero se aproxima, de fato, do zero [24].

De modo geral, a equação (3.18) fornece uma interessante relação entre a topologia e o espectro das moléculas de grafeno, mesmo em caso de configurações mais complicadas, pois para que se tenha um valor estimado para o número de modos zero de uma dada molécula basta conhecer o gênero g e o número de faces abertas N que a mesma possui. Estas informações permitem analisar com maior facilidade as propriedades eletrônicas das moléculas, tais como condutividade elétrica. O resultado obtido também é importante, pois através dele é possível investigar a existência de fases de *Berry* no grafeno de uma maneira bastante simplória, como será demonstrado no capítulo seguinte.

Capítulo 4

Fases de Berry e o teorema do índice

4.1 Fases de Berry

Se um dado sistema não retorna ao seu estado original após ter sido transportado ao longo de um caminho fechado ele é chamado de não-holonômico. Na mecânica quântica, este não retorno pode ser observado através do surgimento de uma fase adicional na função de onda que descreve o sistema. Esta fase “extra” é justificada com base no teorema adiabático.

Sabe-se que, se um hamiltoniano é independente do tempo,

$$H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x), \quad (4.1)$$

onde,

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}. \quad (4.2)$$

No caso em que o hamiltoniano depende do tempo, as autofunções e os autovalores

também dependerão, de forma que,

$$H(t)\psi_n(x,t) = E_n(t)\psi_n(x,t). \quad (4.3)$$

Por outro lado, o teorema adiabático [37] diz que quando um hamiltoniano H varia muito lentamente no tempo, um sistema por ele descrito, permanecerá no seu estado inicial, a menos de um fator de fase adicional que também irá depender do tempo, ou seja,

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x,t)e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t) dt} e^{i\gamma_n(t)}. \quad (4.4)$$

O termo,

$$\theta = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t) dt, \quad (4.5)$$

é conhecido como fase dinâmica. Ele é uma generalização do fator padrão $-E_n t/\hbar$ para o caso em que E_n depende do tempo.

A fase extra é chamada de fase geométrica e é dada por ¹,

$$\gamma_n(T) = i \oint \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R}, \quad (4.6)$$

onde T é o tempo necessário para o sistema retornar ao seu estado inicial, $\mathbf{R} \equiv (R_1, R_2, \dots, R_n)$ e ∇_R é o gradiente com relação a estes parâmetros.

A equação (4.6) foi obtida por *Berry* em 1984 [38], dessa maneira, γ_n é chamada de fase de *Berry*.

É importante observar que γ_n deve ser real, pois se não fosse a quantidade $e^{i\gamma_n}$ não seria um fator de fase e sim um fator exponencial, o que impossibilitaria a normalização de Ψ_n . Essa demonstração é bastante simples, pois assumindo que

¹Ver apêndice A.

ψ_n é normalizada é fácil ver que,

$$\nabla_R \langle \psi_n | \psi_n \rangle = 0, \quad (4.7)$$

logo,

$$\langle \nabla_R \psi_n | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle^* + \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle = 0. \quad (4.8)$$

Como na equação (4.8) um número mais o seu complexo conjugado é zero, este número, $\langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle$, necessariamente é um imaginário puro e, conseqüentemente, γ_n é real, resultado que já era esperado.

4.1.1 As fases de Berry podem ser medidas?

Como se sabe, na mecânica quântica, a função de onda que descreve uma determinada partícula não tem interpretação física imediata. No entanto, $|\Psi(x,t)|^2 dx$ define a probabilidade de que a partícula descrita pela função de onda $\Psi(x,t)$ possa ser encontrada entre x e $x + dx$ no instante t [39]. No cálculo do módulo quadrado da função de onda o fator de fase se cancela, o que gera a crença de que essas grandezas não podem ser medidas. Existem alguns procedimentos que possibilitam esse cálculo, se, por exemplo, um feixe de partículas, todas no mesmo estado Ψ , é dividido em dois e um deles passa adiabaticamente por um potencial e o outro não, quando os dois feixes forem recombinados, a função de onda total terá a forma,

$$\Psi = \frac{1}{2} \Psi_0 + \Psi_0 e^{i\Gamma}, \quad (4.9)$$

onde Ψ_0 é a função de onda do feixe não perturbado, e Γ é a fase “extra” (fase dinâmica mais fase geométrica), adquirida pela variação de H . Neste caso,

$$|\Psi|^2 = \frac{1}{4}|\Psi_0|^2(1 + e^{i\Gamma})(1 + e^{-i\Gamma}) = |\Psi_0|^2 \cos^2(\Gamma/2). \quad (4.10)$$

Olhando para os pontos de interferência construtiva e destrutiva, onde Γ é um múltiplo par ou ímpar de π , respectivamente, a fase pode ser facilmente obtida. Mesmo Γ sendo a contribuição das duas fases, Berry e outros escritores constataram a possibilidade de separar estas duas contribuições [37].

4.1.2 Analogia com o fluxo magnético

Se o parâmetro espacial, disposto na equação (4.6), for tridimensional, ou seja, $\mathbf{R} = (R_1, R_2, R_3)$, é possível fazer uma analogia com o fluxo magnético, pois,

$$\Phi = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{a}, \quad (4.11)$$

onde reescrevendo o campo magnético em termos do potencial vetor ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$), e aplicando o teorema de *Stokes*,

$$\Phi = \int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{a} = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}. \quad (4.12)$$

Por analogia é possível afirmar que a fase geométrica pode ser entendida como sendo o fluxo de um campo magnético que atravessa uma dada superfície S , limitada por uma curva fechada C . E que a quantidade $i\langle\psi_n | \nabla_R \psi_n\rangle$, descrita em (4.6), seria o análogo do potencial vetor, \mathbf{A} .

De igual modo, a fase de *Berry* poderá ser reescrita como uma integral de superfície,

$$\gamma_n(T) = i \int [\nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle] \cdot d\mathbf{a}. \quad (4.13)$$

A equação (4.13) consiste em uma maneira alternativa de escrever γ_n , que é útil em algumas situações.

O efeito *Aharonov-Bohm* pode ser considerado como um exemplo de fase geométrica, como bem observou Berry, em seus trabalhos.

4.1.3 Aplicação

A computação quântica holonômica é baseada nas fases geométricas, também chamadas de *holonomias* [40]. Estas holonomias, por serem transformações unitárias, podem ser entendidas como portas lógicas quânticas² em diferentes implementações. A porta lógica quântica leva um estado inicial $|\psi\rangle_i$ em um estado final $|\psi\rangle_f = U|\psi\rangle_i$, em que U é um operador unitário. A descrição desta transformação pode ser feita da seguinte maneira [41],

$$|\psi\rangle_f = e^{-iE_0t} \Gamma |\psi\rangle_i, \quad (4.14)$$

onde o primeiro termo é a fase dinâmica, que pode ser omitida se for tomado $E_0 = 0$. E o segundo termo é a holonomia, que é dada por

$$\Gamma = e^{i\gamma_n}, \quad (4.15)$$

onde γ_n é explicitado na equação (4.6).

²Ver apêndice B.

Dessa forma, é possível afirmar que em sistemas que mediante uma dada transformação adquirem fases de Berry há a possibilidade de neles serem implementadas portas lógicas quânticas. Tal possibilidade será investigada para o grafeno, através do teorema do índice e sua relação com as características topológicas das variantes geométricas desta molécula.

4.2 Fases de Berry e o teorema do índice

Como foi demonstrado anteriormente, o índice do hamiltoniano proposto para o grafeno é dado em termos do fluxo magnético efetivo que atravessa a molécula, ver equação (3.11). O campo magnético inserido foi justificado pela descontinuidade que surge no grafeno, devido a junção de dois sítios da mesma rede, de modo análogo ao efeito *Aharonov-Bohm*.

De fato, é possível afirmar que o índice do hamiltoniano abordado neste trabalho, o hamiltoniano do grafeno, pode ser escrito em termos de fases de Berry [42], pois combinando as equações (3.11) e (3.18), e observando que o parâmetro R da equação (4.6) é tridimensional (o que permite fazer a analogia das fases de Berry com fluxo magnético), é notório que,

$$\gamma = \pi \text{ind}(H), \quad (4.16)$$

e como o índice de H pode ser expresso em termos das características topológicas das variantes geométricas do grafeno, a fase de Berry poderá ser reescrita da seguinte maneira,

$$\gamma = \pi \text{ind}(H) = \pi (6(1 - g) - 3N), \quad (4.17)$$

A equação (4.17) indica que, pela primeira vez na literatura, é possível obter a partir das características topológicas (número de faces abertas N e gênero g) de uma dada molécula oriunda do grafeno, a sua fase geométrica correspondente.

4.3 Interpretação física

Inúmeras evidências experimentais validam o modelo teórico proposto para o hamiltoniano do grafeno abordado neste trabalho [31]. Também é notório que deste modelo emergem fases de *Berry* e que estas podem ser facilmente obtidas por meio das características topológicas das moléculas provindas do grafeno, ver equação (4.17).

Diante da observância teórica de tais fases e sua relativa facilidade de obtenção, o que resta é tentar esclarecer o que estas fases representam nos sistemas físicos reais e se existe a possibilidade de utilizá-las na computação quântica holonômica.

É importante ressaltar que o fluxo efetivo que atravessa uma determinada molécula de grafeno é o fluxo total, pois ele é resultante da soma de todas as contribuições dos fluxos que atravessam as células pentagonais e heptagonais existentes na molécula, como ilustra a equação (3.16). Dessa forma, a fase extra será adicionada ao espinor que descreve a molécula.

De fato, espera-se que uma molécula de grafeno adquira uma fase extra quando passar por uma determinada transformação, necessariamente adiabática, para que a equação (4.6) tenha validade. No entanto, através da equação (4.17), observa-se que os valores de γ , nestes sistemas, se restringirão apenas a $n\pi$, onde n é um número inteiro, pois é o próprio índice do hamiltoniano. Dessa forma, um espinor qualquer Ψ que descreve uma determinada molécula de grafeno, após sofrer uma

transformação adiabática, resultante da descontinuidade inserida no sistema, terá como autoestado final, apenas duas possibilidades, $\Psi \rightarrow -\Psi$ ou $\Psi \rightarrow \Psi$, pois $e^{in\pi} = \pm 1$. Resultado que irá depender da natureza de $|n|$, se ele for par ou ímpar. O fulereno por exemplo, possui $n = 6$ e, conseqüentemente, o espinor que o descreve não irá adquirir uma fase adicional, pois $e^{i(6\pi)} = 1$.

Certamente o pequeno número de fases que podem ser obtidas usando este procedimento limita, mas não proíbe, a utilização do mesmo na computação quântica holonômica.

4.4 Cálculo de fases e outras características

Por meio da equação (4.17) é bastante simples calcular as fases correspondentes a cada uma das variantes geométricas estudadas.

Algumas pesquisas têm demonstrado que o grafeno toroidal é estável. Além disso, tubos helicoidais também foram obtidos experimentalmente. Tais observações levaram alguns pesquisadores a propor a existência de arranjos mais complexos, constituídos por heptágonos e hexágonos [43]. As estruturas propostas possuem número de gêneros g elevado. Na figura 4.1 são ilustrados fulerenos com g elevado. O C_{2040} , que possui $g = 11$ e o C_{1896} , com $g = 5$.

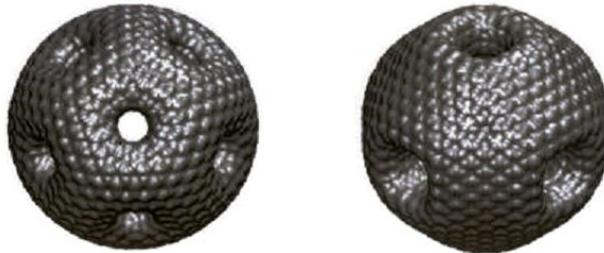


Figura 4.1: Da esquerda para direita a primeira figura é o C_{2040} . A segunda é o C_{1896} . Figura extraída de [43].

Nanotubos com g elevado também são possíveis e estão ilustrados na figura 4.2. São eles o C_{2880} , que possui $g = 17$ e o C_{3568} , com $g = 21$.



Figura 4.2: Da esquerda para direita a primeira figura é o C_{2880} . A segunda é o C_{3568} . Figura extraída de [43].

Outras estruturas que também possuem g elevado podem ser encontradas na literatura [44]. No entanto, elas não serão abordadas neste trabalho, pois em algumas existem células octogonais. Células estas que não foram consideradas nesta pesquisa.

Informações a respeito das células que constituem essas estruturas são essen-

ciais para avaliar o número de modos zero das respectivas moléculas bem como, analisar as propriedades eletrônicas e as possíveis fases de Berry existentes em tais sistemas. De forma que, todas estas características estão dispostas de forma sucinta na tabela 4.1.

Moléculas	N	g	Pentág.	Heptág.	Modos zero	Fase geométrica
Nanotubo	2	0	0	0	0	0
Fulereo	0	0	12	0	6	6π
Toro	0	1	0	0	0	0
Bitoro	0	2	0	12	6	-6π
C_{1896} (fuler.)	0	5	0	48	24	-24π
C_{2040} (fuler.)	0	11	0	120	60	-60π
C_{2880} (nanot.)	0	17	0	192	96	-96π
C_{3568} (nanot.)	0	21	0	240	120	-120π

Tabela 4.1: Características de algumas moléculas oriundas do grafeno.

É possível fazer uma análise sobre o número de modos zero existente nas estruturas anteriormente ilustradas. Como foi mencionado, este número pode ser calculado por meio da equação (3.18) e através dela observa-se que, tanto os fulerenos, quanto os nanotubos de alto gênero, terão número de modos zero elevado, como consta na tabela 4.1.

Devido à grande quantidade de modos zero pode-se afirmar que estas estruturas, até então hipotéticas, poderão apresentar interessantes propriedades eletrônicas. Cálculos a partir do modelo *tight binding* mostram que em torno dos furos, os gêneros, o comportamento eletrônico destas estruturas é metálico [43].

Outra consideração a ser feita com relação aos nanotubos e fulerenos de alto gênero é quanto ao número de heptágonos que os constituem. Como já havia sido previsto em [43], estas estruturas são constituídas apenas por heptágonos e hexágonos, o que implica no fato delas possuírem curvatura negativa. Analisando a equação (3.14), concluí-se que de fato deve haver heptágonos em excesso com relação ao número de pentágonos, ou seja, os resultados dispostos neste trabalho corroboram com a teoria apresentada em [43].

Ainda com base na equação (3.14) e sabendo que as estruturas mencionadas não são constituídas por pentágonos, é possível encontrar o número exato de heptágonos inseridos nestas moléculas, da mesma maneira que foi feito com o fulereno, resultado que é perfeitamente condizente com os dados experimentais.

Apesar de utilizar o termo nanotubo, para se referir as estruturas ilustradas na figura 4.2, é importante observar que elas não possuem faces abertas, ou seja, possuem $N = 0$, diferentemente dos nanotubos convencionais, de acordo com o disposto na tabela 4.1.

Capítulo 5

Conclusão

Sem dúvida alguma o grafeno é um material muito promissor, tanto do ponto de vista teórico, quanto do ponto de vista experimental, mesmo mediante as dificuldades de sua obtenção em escala industrial, pois acredita-se que esta barreira é meramente tecnológica e brevemente tal obstáculo será contornado.

Neste trabalho foi realizado um estudo teórico para demonstrar a utilidade do teorema do índice, quando aplicado às variantes geométricas do grafeno, visto que essas moléculas podem ser descritas pelo operador de Dirac relativístico.

Foi constatado que o teorema do índice de *Atiyah-Singer*, é essencial ao estudo do grafeno, pois através dele é possível estimar o número de modos zero existentes nas variantes geométricas desta molécula e, conseqüentemente, avaliar a condutibilidade elétrica das estruturas estudadas.

O referido teorema também viabiliza utilizar a relação obtida entre o índice da molécula e suas características topológicas, para investigar a existência de fases de Berry e a possibilidade de fazer computação quântica holonômica no grafeno, algo inusitado na literatura.

Não fazendo uso de muitos critérios, é possível concluir que, de fato, tal estudo pode ser realizado. No entanto, o número de portas lógicas quânticas obtidas por meio deste procedimento será limitado, pois $\gamma = n\pi$, onde n nada mais é do que o índice do hamiltoniano do sistema, o que faz dele um número inteiro. Isso permite apenas duas possibilidades para a transformação do espinor que descreve a molécula, mas não impossibilitaria o emprego da computação quântica holonômica.

Mediante o êxito obtido com relação ao emprego do teorema do índice a moléculas experimentalmente já estudadas, a exemplo do nanotubo e do fulereno, este teorema também foi aplicado a moléculas, até então, hipotéticas. Tais moléculas, "nanotubos" e fulerenos com número de gêneros elevado, só foram investigadas numericamente. Mas mesmo tratando-se de cálculos numéricos as características previstas para estas moléculas foram condizentes com as elucidadas pela teoria abordada neste trabalho.

Um possível empecilho ao emprego desta teoria está relacionado a natureza da transformação que está sendo trabalhada, pois para que γ seja de fato uma fase de Berry, esta transformação deve ser adiabática. No entanto, esta fase é justificada pelo surgimento de um fluxo magnético efetivo, que por sua vez, é decorrente da inserção de descontinuidade no grafeno. Dessa forma, questiona-se, esta transformação pode ou não ser adiabática? Ou ainda, sob que aspectos esta consideração pode ser feita? Tais indagações merecem uma investigação mais pormenorizada, que será abordada na continuação destes estudos.

Apêndice A

Fórmula de Berry

De acordo com o teorema adiabático quando um hamiltoniano H varia muito lentamente no tempo, um sistema por ele descrito, permanecerá no seu estado inicial, a menos de um fator de fase adicional γ_n que também irá depender do tempo, ou seja,

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x,t)e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t) dt} e^{i\gamma_n(t)}, \quad (\text{A.1})$$

onde γ_n é a chamada fase geométrica. Sabe-se que a equação de *Schrödinger* dependente do tempo é dada por,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H(t)\Psi. \quad (\text{A.2})$$

Substituindo a equação (A.1) na equação (A.2),

$$i\hbar \left[\frac{\partial \psi_n}{\partial t} e^{i\theta_n} e^{i\gamma_n} - \frac{i}{\hbar} E_n \psi_n e^{i\theta_n} e^{i\gamma_n} + \frac{d\gamma_n}{dt} \psi_n e^{i\theta_n} e^{i\gamma_n} \right] = [H\psi_n] e^{i\theta_n} e^{i\gamma_n} = E_n \psi_n e^{i\theta_n} e^{i\gamma_n}, \quad (\text{A.3})$$

onde, observando a equação (A.3), é fácil ver que,

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial t} + i\psi_n \frac{d\gamma_n}{dt} = 0. \quad (\text{A.4})$$

Tomando o produto interno da equação (A.4) com ψ_n , obtém-se,

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = i\langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial t} \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Sabe-se que a dependência de $\psi_n(x,t)$ no tempo deve-se a algum parâmetro $R(t)$ no hamiltoniano que está variando em t . Dessa forma, é possível escrever,

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \frac{dR}{dt}, \quad (\text{A.6})$$

então,

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = i\langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \rangle \frac{dR}{dt}. \quad (\text{A.7})$$

Sendo assim, γ_n pode ser facilmente encontrada a partir da integração direta de (A.7), logo,

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \rangle \frac{dR}{dt'} dt' = i \int_{R_i}^{R_f} \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \rangle dR, \quad (\text{A.8})$$

onde R_i e R_f são, respectivamente, os valores inicial e final de $R(t)$. A partir da equação (A.8) é possível observar que, se o hamiltoniano retornar ao seu estado inicial, após um certo tempo T , então $\gamma_n = 0$, e este resultado não é fisicamente interessante.

Por outro lado, na equação (A.8), foi considerado que apenas um parâmetro do hamiltoniano estava variando. Considerando que neste hamiltoniano existem

N parâmetros variando, de modo que $R_1(t), R_2(t), \dots, R_N(t)$, é possível escrever,

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\partial \psi_n}{\partial R_1} \frac{dR_1}{dt} + \frac{\partial \psi_n}{\partial R_2} \frac{dR_2}{dt} + \dots + \frac{\partial \psi_n}{\partial R_N} \frac{dR_N}{dt} = (\nabla_R \psi_n) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt}, \quad (\text{A.9})$$

onde $\mathbf{R} \equiv (R_1, R_2, \dots, R_n)$ e ∇_R é o gradiente com relação a estes parâmetros.

Fazendo estas considerações (A.8) torna-se,

$$\gamma_n(t) = i \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R}, \quad (\text{A.10})$$

e se o hamiltoniano retorna ao seu estado original depois de um certo tempo T , a fase extra será dada por,

$$\gamma_n(t) = i \oint \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R}. \quad (\text{A.11})$$

A integral na equação (A.11) só depende do caminho percorrido e, em geral, ela é diferente de zero, de forma que, a fase geométrica, γ é chamada de fase de *Berry*, que foi quem primeiro a obteve em 1984.

Apêndice B

Portas lógicas quânticas

Na computação, sendo ela clássica ou quântica, as portas lógicas são elementos fundamentais. Algo também essencial à computação é o conceito de bit. Na computação clássica o bit assume apenas dois valores, "0" e "1". No caso quântico à um análogo ao bit denominado q-bit. Ele é representado pelos estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$. O que torna a computação quântica mais promissora é a possibilidade de existir estados intermediários [45], de forma que é possível obter um autoestado definido por,

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (\text{B.1})$$

onde α e β são números complexos. Ao medir um q-bit, o que se encontra é um estado $|0\rangle$ com probabilidade $|\alpha|^2$ e um estado $|1\rangle$ com probabilidade $|\beta|^2$. Naturalmente, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, pois a soma das probabilidades deve ser 1. Em termos matemáticos, o q-bit seria um vetor unitário em um espaço bidimensional complexo.

As portas lógicas são responsáveis por manipular as informações. Considerando,

por exemplo, a porta lógica clássica NÃO, observa-se que nela os estados 0 e 1 são trocados um pelo outro, ou seja, $0 \rightarrow 1$ e $1 \rightarrow 0$. Um bom análogo quântico para a porta NÃO pode ser dado pela transformação que leva um estado qualquer $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$, para um estado no qual os papéis são invertidos, $\alpha |1\rangle + \beta |0\rangle$.

Uma forma conveniente para representar a porta lógica quântica NÃO, é através da representação matricial. Desse modo, é útil definir uma matriz X , tal que,

$$X \equiv \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.2})$$

e o estado $\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle$ sob a forma,

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \quad (\text{B.3})$$

onde a primeira linha corresponde à amplitude $|0\rangle$ e a linha inferior à amplitude de $|1\rangle$. Sendo assim, o resultado da aplicação da porta quântica NÃO será,

$$X \cdot \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

Desse resultado é possível observar que, portas quânticas sobre um q-bit podem ser descritas por matrizes 2×2 .

A condição para que uma matriz U represente uma porta, é que essa matriz seja unitária [40], o que é equivalente à $U^\dagger U = I$, onde U^\dagger é adjunta de U (obtida transpondo-se e tomando-se o complexo conjugado de U), e I é a matriz identidade 2×2 .

Existe uma infinidade de portas de um q-bit, pois existem inúmeras matrizes unitárias. No entanto, é possível demonstrar que toda matriz unitária 2×2 pode ser decomposta como [45],

$$U = e^{i\alpha} \begin{bmatrix} e^{-i\beta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\beta/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} & -\sin \frac{\gamma}{2} \\ \sin \frac{\gamma}{2} & \cos \frac{\gamma}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\delta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\delta/2} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

onde α , β , γ e δ são reais. Essa decomposição em matrizes de rotação pode ser utilizada como uma receita para se construir matrizes unitárias.

No caso da computação quântica holonômica é possível afirmar que a equação (B.5) também engloba as holonomias (as fases geométricas), garantindo dessa forma que elas possam ser entendidas como portas lógicas quânticas.

Também existe a possibilidade de serem implementadas portas lógicas quânticas com mais de um q-bit. No entanto, elas não serão tratadas neste trabalho, pois o objetivo deste apêndice é ilustrar como atua uma porta lógica quântica qualquer, objetivo este que pode ser perfeitamente satisfeito fazendo uso de sistemas com um único q-bit.

Referências Bibliográficas

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva and A. A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science **306**, 666, (2004).
- [2] P. R. Wallace, *The band theory of graphite*, Phys Rev **71**, 622, (1947).
- [3] M. O. Goerbig, *Quantum Hall Effects* (Université Paris-Sud 2009).
- [4] E. V. Gorbar and V. P. Gusynin, *Gap generation for Dirac fermions on Lobachevsky plane in a magnetic field*, AnnalsPhys **323**, 2132, (2008).
- [5] X. Liu and R. Zhang, *Topological Vortices in Chiral Gauge Theory of Graphene*, Ann. Phys **325**, 384, (2010).
- [6] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, *Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene*, Nature **438**, 197, (2005).
- [7] E. V. Gorbar and V. P. Gusynin H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley, *C60: Buckminsterfullerene*, Nature **318**, 162, (1985).

- [8] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys. **81**, 109, (2009).
- [9] S. Iijima, *Helical microtubules of graphitic carbon*, Nature **354**, 56, (1991).
- [10] X. Wang, L. Zhi and K. Mullen, *Transparent, conductive graphene electrodes for dye-sensitized solar cells*, Nano Letters **8**, 323, (2008).
- [11] F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, E. W. Hill, P. Blake, M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, *Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene*, Nat. Mater **6**, 652, (2007).
- [12] M. C. Lemme, T. J. Echtermeyer, M. Baus and H. Kurz, *A graphene field-effect device*, IEEE Electron Device Lett. **28**, 282, (2007).
- [13] T. J. Echtermeyer, M. C. Lemme, M. Baus, B. N. Szafranek, A. K. Geim and H. Kurz, *Nonvolatile switching in graphene field-effect devices*, IEEE Electron Device Lett. **29**, 952, (2008).
- [14] L. D. Landau, *Zur Theorie der phasenumwandlungen II*, Phys. Z. Sowjetunion **11**, 26, (1937).
- [15] N. D. Mermin, *Crystalline order in two dimensions*, Phys. Rev. **176**, 250, (1968).
- [16] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics, Part I*, (Pergamon Press, Oxford, 1980).
- [17] D. R. Nelson, T. Piran, and S. Weinberg, *Statistical Mechanics of Membranes and Surfaces* (World Scientific, 2004).

- [18] B. Partoens and F. M. Peeters, *From graphene to graphite: Electronic structure around the K point*, Phys. Rev. B **74**, 075404 (2006).
- [19] M. S. Dresselhaus and G. Dresselhaus, *Intercalation compounds of graphite*, Adv. Phys. **51**, 1, (2002).
- [20] A. Krishnan, *Graphitic cones and the nucleation of curved carbon surfaces*, Nature **388**, 451, (1997).
- [21] A. C. Ferrari, *Raman spectrum of graphene and graphene layers*, Phys. Rev. Lett. **97**, 187401, (2006).
- [22] P. W. Sutter, J. I. Flege and E. A. Sutter, *Epitaxial graphene on ruthenium*, Nature Materials **7**, 406, (2008).
- [23] M. A. H. Vozmediano, F. de Juan and A. Cortijo, *Gauge fields and curvature in graphene*, Journal of Physics: Conference Series **129**, 012001, (2008).
- [24] J. K. Pachos, *Manifestations of topological effects in graphene*, Cont. Phys. **50**, 375, (2009).
- [25] A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano, *Electronic properties of curved graphene sheets*, Europhys. Lett. **77**, 47002, (2007).
- [26] C. Kittel, *Introdução à Física do Estado Sólido* (LTC Editora, Rio de Janeiro, 2006).
- [27] A. T. Riera Júnior, *Defeitos em Nanofitas de Grafeno Zigzag*, Dissertação de Mestrado (2008).

- [28] J. K. Pachos, A. Hatzinikitas and M. Stone, *Zero modes of various graphene configurations from the index theorem*, Eur. Phys. J. - Special Topics **148**, 127, (2007).
- [29] R.S. Deacon, K-C. Chuang, R. J.Nicholas, K.S. Novoselov and A.K. Geim, *Cyclotron Resonance study of the electron and hole velocity in graphene monolayers* , Phys. Rev. B **76**, 081406(R), (2007).
- [30] Y. Aharonov and D. Bohm, *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*, Phys. Rev. **115**, 485, (1959).
- [31] J. González, F. Guinea and M. A. H. Vozmediano, *The electronic spectrum of fullerenes from the Dirac equation*, Nucl.Phys. B **406**, 771, (1993).
- [32] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics* (Institute of Physics Publishing Bristol, 2003).
- [33] D. V. Vassilevich, *Heat kernel expansion: user's manual*, Phys. Rept. **388**, 279, (2003).
- [34] I. Lakatos, *Proofs and Refutations* (Cambridge Technology Press, 1976).
- [35] J. L. Kazdan and F. W. Warner, *Curvature Functions for 2-Manifolds with Negative Euler Characteristic*, Bulletin of the American Mathematical Society **78**, (1972).
- [36] J. K. Pachos and M. Stone, *An Index Theorem for Graphene*, Int. J. Mod. Phys. B **21**, 5113, (2007).
- [37] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prencite Hall, 1995).

- [38] M. V. Berry, *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*, Proc. R. Soc. A **392**, 45, (1984).
- [39] E. Gasiorowicz, *Física Quântica* (Guanabara Dois, Rio de Janeiro, 1979).
- [40] K. Bakke, *Fases Geométricas, Quantização de Landau e Computação Quântica Holonômica para Partículas Neutras na Presença de Defeitos Topológicos*, Tese de Doutorado (2009).
- [41] K. Bakke, C. Furtado and S. Sergeenkov, *Holonomic quantum computation associated with a defect structure of conical graphene*, EPL (Europhysics Letters) **87**, 30002, (2009).
- [42] Z. E. Ezawa, *Quantum Hall Effects: Field Theoretical Approach and Related Topics* (World Scientific Publishing, 2008).
- [43] H. Terrones, M. Terrones and J. L. Morán-Lopez, *Curved nanomaterials*, Current Science **81**, 8, (2001).
- [44] C. Chuang and B-Y. Jin, *Systematics of High-Genus Fullerenes*, Journal of Chemical Information and Modeling **49**, 1664, (2009).
- [45] M. Nielsen and I. Chuang, *Quantum computation and quantum information* (Cambridge University Press, Cambridge, UK 2000).